

## MODELIZACION NUMERICA DE LA COMBUSTION EN MOTORES DE COMBUSTION INTERNA

**Damian E. Ramajo\*, Norberto Nigro\***

\*Centro Internacional de Mecánica Computacional CIMEC  
Instituto de Tecnología Química, INTEC, CONICET  
Güemes 3450, Santa Fe 3000, Argentina  
e-mail: dramajo@ceride.gov.ar, nnigro@intec.unl.edu.ar

**Key words:** Combustión, Modelo multi-zona, Cinética de NO.

**Resumen.** *Una simulación del ciclo termodinámico del cilindro en un motor encendido por chispa fue desarrollada. El cilindro fue caracterizado mediante un esquema cero dimensional el cual incluyó el uso de un modelo de dos zonas para el proceso de combustión. Los parámetros concentrados de energía, presión, densidad y temperatura fueron considerados homogéneos en cada zona.*

*La evolución de 12 especies químicas fue calculada considerando equilibrio químico para 11 de ellas al reducir un sistema de 11 ecuaciones no lineales a uno con solo dos. El modelo fue mejorado al incluir un modelo de cinética de primer orden (Zeldovich extendido) para simular las emisiones de óxido Nítrico.*

*Las estimaciones fueron contrastadas con resultados hallados en bibliografía para un motor V-8 de ignición por chispa, de cuatro tiempos alimentado con isoctano<sup>1,2</sup>. Para ello una ley de tasa de quemado (función de Wiebe) fue implementada.*

*Las estimaciones de performance y variables termodinámicas halladas concordaron razonablemente bien con los resultados experimentales y con simulaciones numéricas similares.*

*El desarrollo matemático de los modelos es incluido en el presente trabajo.*

## 1 INTRODUCCIÓN

Uno de los principales objetivos en el diseño de motores de alta prestación está orientado hacia la disminución de emisiones. Esto es motivado por las crecientes restricciones tanto en la norma europea como americana en cuanto a los niveles de emisiones de monóxido de carbono, óxido nítrico y otros contaminantes generados por un número cada vez mayor de vehículos que funcionan ya sea mediante ciclo Diesel u Otto. Por otra parte, los esfuerzos por mejorar el rendimiento, aumentar la potencia, disminuir el consumo específico de combustible y mejorar los combustibles actuales sustentan las fuertes inversiones en el desarrollo de nuevos conceptos para poder salvaguardar la infraestructura montada alrededor de la producción y comercialización de motores a explosión. Esta última amenazada por el incipiente avance de la propulsión eléctrica en vehículos híbridos de la mano de la optimización de las ya utilizadas celdas de combustible.

El avance en la comprensión de los fenómenos fisicoquímicos que ocurren dentro de la cámara de combustión de un motor ha sido lento, fundamentalmente a causa de la falta de equipamiento adecuado para observar este tipo de fenómenos. Los regímenes de giro cada vez mayores de las máquinas actuales, sumado a la alta turbulencia generada en los cilindros y ductos, y a la rapidez de las reacciones químicas, hacen extremadamente compleja la observación de los fenómenos que ocurren dentro del cilindro.

En los últimos años han habido avances en el equipamiento de laboratorio utilizado para este fin pero los ensayos experimentales resultan de un costo elevado e insumen demasiado tiempo. Por este motivo la simulación computacional se torna imprescindible como una forma de ahorrar esfuerzo y dinero en las fases de diseño e investigación.

La modelización matemática de la combustión no es simple ya que requiere el acoplamiento de fenómenos físicos y químicos, junto con el uso de datos experimentales relativos a la termoquímica de las reacciones involucradas.

El objetivo de este proyecto es el desarrollo de una aplicación en 3D sobre una geometría variable en el tiempo (cámara de combustión), con flujo altamente turbulento.

Como primer paso en este sentido se plantea obtener una mejor comprensión de los fenómenos de combustión y movimiento de carga dentro del cilindro para luego introducir estos conceptos en un simulador de motor sustentado en un código *CFD*, ya desarrollado y validado<sup>8,9</sup>.

El objetivo del presente trabajo es desarrollar un código computacional basado en parámetros termodinámicos concentrados (cero-dimensionales) para el cilindro del motor. El código permite la evaluación de 12 especies químicas, 11 de las cuales son consideradas en equilibrio químico (velocidad de reacción infinita). Por el contrario, las reacciones que producen óxido nítrico son de naturaleza más lenta, por lo cual un modelo de cinética de primer orden (Zeldovich extendido) resulta más adecuado a fin de evitar sobre estimaciones.

La importancia de la temperatura desarrollada durante la combustión, causante principal de la creación de los óxidos de nitrógeno, obliga al uso de modelos multi-zonales. En este trabajo un modelo de dos zonas es implementado y la concentración de las 12 especies es calculada sólo en la zona quemada, y es mantenida congelada en la zona no quemada. Esta hipótesis es

justificada por las temperaturas alcanzadas en dicha zona y para las cuales las reacciones químicas son despreciables.

## 2 TERMODINÁMICA. CONCEPTOS BÁSICOS

La primera ley de la termodinámica para un sistema abierto que intercambia trabajo y calor con el medio puede escribirse como:

$$\dot{E}^i = \dot{Q}_{ht}^i - p \dot{V}^i + \sum_{j=1}^N h_j^i \dot{m}_j^i \quad (1)$$

donde el subíndice  $j$  indica la especie química considerada y el superíndice  $i$  identifica a cada una de las dos zonas. El balance de masa para este sistema será,

$$\dot{m}^i = \dot{m}_{in}^i + \dot{m}_{ex}^i + \dot{m}_f^i \quad (2)$$

donde  $\dot{m}_f^i$  es la masa transferida de la zona no quemada a la quemada a través del frente de llama. Tanto  $\dot{Q}_{ht}^i$  como  $p$  y  $h$  son funciones de la temperatura por lo cual la energía total en cada zona es una función de  $T$  y de la concentración de las especies.

### 2.1 Cálculo de la Temperatura

Sí la energía  $E^i$  y el vector de concentraciones molares  $\eta^j$  en cada zona son conocidos entonces la temperatura correspondiente puede ser hallada. La energía de la mezcla luego de aplicar las simplificaciones 2 y 14 puede calcularse mediante la expresión,

$$E^i = \rho^i \cdot e^i = \sum_{j=1}^N \eta_j^i \cdot M_j \cdot [Cv_j^i \cdot T_j^i + h_j^0] \quad (3)$$

donde  $h_j^0$  es la entalpía de formación de la especie  $j$  a la temperatura de referencia. Aproximando la energía específica mediante un función polinómica del tipo

$$e^i = h^i - \bar{R}^i T^i = \sum_{j=1}^N \left\{ h_j^0 + \bar{R}^i \left[ (a_{1,j} - 1) T^i + \sum_{n=2}^{n=5} \frac{a_{n,j}}{n} (T^i)^n \right] \right\} \quad (4)$$

donde  $a_{nj}$  son los coeficientes para cada especie agrupados por rango de temperatura y fueron tomados de las tablas JANNAF<sup>3</sup>. La temperatura  $T^i$  puede hallarse ahora con el método de Newton iterando hasta cumplir con los requisitos de precisión estipulados.

### 2.2 Cálculo de la presión

En cada paso de tiempo, la presión en el cilindro es alterada por el cambio de temperatura producto de la combustión y las pérdidas de calor y por el cambio de volumen debido al movimiento del pistón. Asumiendo que la ley de los gases ideales puede aplicarse en ambas

zonas, entonces la presión resultante para cada nuevo estado termodinámico puede obtenerse como<sup>4</sup>,

$$p = \frac{(m^u R^u T^u + m^b R^b T^b)}{V^u + V^b} \quad (6)$$

### 3 DESCRIPCIÓN DEL MODELO

Las principales características, suposiciones y simplificaciones adoptadas en este simulador de motor son:

1. El sistema termodinámico solo incluye el cilindro.
2. El cilindro es cero dimensional, la energía cinética de los gases no es considerada.
3. El sistema termodinámico es estacionario. La solución es hallada cuando al cabo de  $n$  iteraciones (3 resultaron suficientes) el estado termodinámico resultante (720° CA) es convergente.
4. La presión se considera homogénea en todo el cilindro. Los cambios de presión son equilibrados adiabáticamente.
5. La temperatura, densidad, concentraciones y parámetros termodinámicos son espacialmente homogéneos dentro de cada zona y varían solo con el tiempo.
6. 11 de las 12 especies se encuentran en equilibrio termodinámico en cada paso de tiempo y sus concentraciones son halladas a la presión y temperatura correspondiente.
7. La concentración de óxido nítrico es hallada mediante una ecuación de cinética de primer orden.
8. La tasa másica de quemado  $x_b$  es proporcionada a priori (la función de Wiebe es adoptada).
9. Las propiedades termodinámicas son aproximadas mediante funciones polinómicas cuyos coeficientes son tomados de las tablas JANNAF<sup>3</sup>.
10. La temperatura de las paredes del cilindro es homogénea y constante en el tiempo.
11. Las pérdidas son consideradas en forma separada en cada una de las dos zonas.
12. Los ductos son considerados como volúmenes infinitos a presión y temperatura constantes.
13. Las válvulas de admisión y escape son simuladas mediante modelos placa-orificio. El flujo es uno-dimensional, cuasi-estático, adiabático y reversible. Un coeficiente de descarga experimental obtenido estáticamente es usado para corregir el modelo. La alzada de las válvulas obedece a un perfil senoidal.
14. No existe fuga de gases por los aros del pistón (blow-by).
15. El mezclado es perfecto dentro de cada zona y el combustible está completamente vaporizado al ingresar al cilindro (no se consideran calores latentes).
16. La eficiencia de la combustión es perfecta. No existe combustible como producto.

**Admisión y compresión:** solo la zona no quemada existe durante esta parte del ciclo y los gases residuales que no han sido completamente barridos en la carrera de escape en el ciclo

anterior, se mezclan instantáneamente con la mezcla fresca ( $C_8H_{18}$ ,  $O_2$  y  $N_2$ ) ingresada por la válvula de admisión y parte de ella continua saliendo por la válvula de escape mientras permanece abierta.

**Combustión:** una vez que la combustión comienza, la masa quemada ( $m_b$ ) y el volumen de la zona quemada  $V_b$  son calculados en forma directa al conocer la tasa de quemado  $x_b$ . La interfase entre las dos zonas (frente de llama) es una discontinuidad atravesada por una cantidad de masa igual a la masa quemada, transportando una energía igual a su entalpía. No se considera transferencia de calor a través de la discontinuidad.

**Expansión y escape:** Una vez que la masa no quemada desaparece el modelo vuelve a tener solo una zona.

### 3.1 Modelo de combustión

La fracción de masa quemada ( $x_b = m_b/m$ ) puede ser determinada desde el análisis de la presión en el cilindro<sup>5</sup>. A partir de ensayos experimentales la gráfica de  $x_b$  en función del ángulo del cigüeñal resulta ser muy bien ajustada por una curva en forma de “S”. En este trabajo la forma funcional dada por la ecuación de Wiebe fue empleada para caracterizar  $x_b$ .

$$x_b = 1 - \exp\left(-a\left(\frac{\theta - \theta_0}{\Delta\theta}\right)^{(m+1)}\right) \quad (7)$$

donde  $a$  y  $m$  son parámetros seleccionados al comparar con la curva de presión experimental. Los valores que permiten un buen ajuste dependen de funciones complejas que tienen en cuenta tanto la turbulencia, como las características de la reacción química, el combustible empleado, la relación de equivalencia aire / combustible, la geometría de la cámara, etc. Los valores empleados en el modelo fueron sugeridos por Heywood<sup>5</sup>.

Una útil relación entre  $x_b$  y la fracción de volumen quemado  $y_b$  ( $y_b = V_b/V$ ) puede hallarse a partir de la ley de los gases ideales y de las identidades  $m = m_u + m_b$  y  $V = V_u + V_b$ , a saber:

$$y_b = \frac{1}{1 + \frac{\rho_b}{\rho_u}\left(\frac{1}{x_b} - 1\right)} \quad (8)$$

Mediante  $y_b$  el volumen quemado puede ser aproximado, y suponiendo que el frente de llama avanza en forma esférica desde la posición de la bujía, entonces su posición ( $r_b$ ) puede ser fácilmente determinada. Existe otra familia de modelos donde la posición del frente se calcula a partir de una dinámica donde su velocidad de propagación se debe estimar a partir de correlaciones experimentales. En estos modelos se utiliza frecuentemente el modelo de llama laminar de Kuehl<sup>6</sup> corregido por turbulencia<sup>10</sup>.

### 3.2 Transferencia de calor

La transferencia de calor entre los gases y las paredes del cilindro considerando sólo la convección es,

$$\dot{Q}_{hti} = C_Q \cdot h_c \cdot A_i (T_{wall} - T_i) \quad (9)$$

$C_Q$  es un coeficiente que surge al comparar la simulación con resultados experimentales y fue tomado en este trabajo igual a 0.8,  $h_c$  es un coeficiente pelicular promedio calculado considerando que el fluido se mueve dentro del cilindro a una velocidad igual a la velocidad promedio del pistón y aplicando la metodología mostrada por Heywood<sup>5</sup>.  $A_i$  es el área de transferencia de calor para cada zona. El cálculo detallado tanto de  $h_c$  como de las áreas de transferencia puede consultarse en el apéndice.

La radiación no ha sido tenida en cuenta en el modelo, aunque de ser necesario puede corregirse el coeficiente pelicular para incluir su efecto. Tampoco se considera que exista transferencia de calor a través del frente de llama.

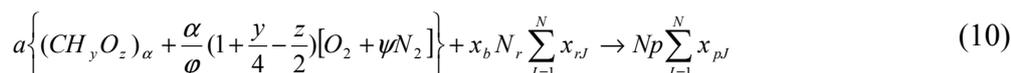
## 4 CÁLCULO DE LAS ESPECIES QUÍMICAS

En este trabajo 12 especies químicas son consideradas como se muestra en la siguiente tabla.

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Fuel	O <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	CO <sub>2</sub>	CO	H <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>	OH	NO	O	H	N

Tabla 1. Códigos utilizados para cada una de las especies químicas.

La ecuación estequiométrica para la reacción global de combustión para una mezcla puede expresarse como,

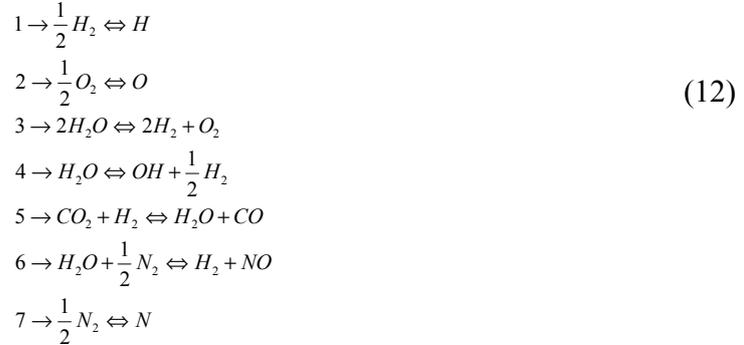


donde  $\alpha$ ,  $f$  y  $z$  son el número de átomos de carbono, hidrógeno y oxígeno presentes en un combustible genérico del tipo  $C_\alpha H_f O_z$ .  $Np$  es el número de moles de producto obtenidos.  $a$  es la cantidad de moles de mezcla *aire-combustible-residuales* quemados para un ángulo de cigüeñal dado y puede ser relacionada con  $x_b$  mediante  $a = n_{ig} x_b$ , donde  $n_{ig}$  es la cantidad de moles de mezcla dentro del cilindro al momento de la ignición.

Los cuatro balances atómicos que corresponden son:

$$\begin{aligned} C &= a\alpha + 2n_{r3} + 2n_{r4} = Np(x_{p3} + x_{p4}) \\ H &= a\alpha y + 2n_5^0 + 2n_{r2} + 2n_{r5} + n_{r7} + n_{r10} = Np(2x_{p2} + 2x_{p5} + x_{p7} + x_{p10}) \\ O &= a\alpha z + 2n_1^0 + 2n_{r1} + n_{r2} + 2n_{r3} + n_{r4} + n_{r7} + n_{r8} + n_{r9} = Np(2x_{p1} + x_{p2} + 2x_{p3} + x_{p4} + x_{p7} + x_{p8} + x_{p9}) \\ N &= 2n_6^0 + 2n_{r6} + n_{r8} + n_{r11} = Np(2x_{p6} + x_{p8} + x_{p11}) \end{aligned} \quad (11)$$

Las reacciones químicas evaluadas para obtener las concentraciones en equilibrio fueron



Al utilizar fracciones molares, la siguiente relación entre ellas también debe cumplirse,

$$\sum_{i=1}^{11} x_i = x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + x_6 + x_7 + x_8 + x_9 + x_{10} + x_{11} = 1 \tag{13}$$

#### 4.1 Metodología para la reducción del sistema de 11 a 2 ecuaciones

La metodología empleada fue extraída de un trabajo de Benson y colaboradores<sup>6</sup> y modificada de modo que la cantidad  $a$  de mezcla aire-combustible empleada fuese un dato en lugar de una incógnita del problema. Partiendo de las ecuaciones (11), (12) y (13) es posible expresar el sistema por medio de dos incógnitas  $b$  y  $N_p$ , donde  $b = x_2/x_5$ . Las constantes de equilibrio para las reacciones detalladas en (12) pueden escribirse como,

$$\begin{aligned}
 Ka &= \frac{K_{p1}}{\sqrt{P}} = \frac{x_{10}}{\sqrt{x_5}} & Kb &= \frac{K_{p2}}{\sqrt{P}} = \frac{x_9}{\sqrt{x_1}} & Kc &= \frac{K_{p3}}{P} = \frac{x_1}{b^2} & Kg &= \frac{K_{p7}}{\sqrt{P}} = \frac{x_{11}}{\sqrt{x_6}} \\
 Kd &= \frac{K_{p4}}{\sqrt{P}} = \frac{x_7}{b\sqrt{x_5}} & Ke &= K_{p5} = \frac{bx_4}{x_3} & Kf &= \frac{K_{p6}}{\sqrt{P}} = \frac{x_8}{b\sqrt{x_6}}
 \end{aligned} \tag{14}$$

donde para una cantidad  $a$  de mezcla combustible-aire y una cantidad  $N_r$  de gases residuales con fracciones molares  $x_{rj}$ , se obtienen  $N_p$  moles de producto con fracciones molares  $x_{pj}$ .

$x_r$  es el vector de fracciones molares de los gases residuales en el cilindro. La cantidad total de moles residuales  $N_r$  es una función de la fracción de gases residuales que no son barridos en el ciclo anterior  $x_{res}$  y de la fracción de los gases que son re ingresados al cilindro  $x_{EGR}$ . Conociendo la fracción molar de los gases de escape  $x_{rj}$ , entonces

$$N_r = \frac{(x_{res} + x_{EGR})m}{PW_{mix}} \tag{15}$$

donde  $m$  es la masa total que ingresó al cilindro en el ciclo anterior y  $PW_{mix}$  es el peso molecular de la mezcla en el escape.

El lado izquierdo de (11) se refiere a la cantidad inicial de átomos de carbono, hidrógeno,

oxígeno y nitrógeno que intervienen cuando se quema una cantidad  $a$  de moles de mezcla. Tomando el balance para el hidrógeno (11.2) y reemplazando  $x_2$  por  $b.x_5$ , y despejando  $x_7$  y  $x_{10}$  de (14.1) y (14.4) queda,

$$\frac{H}{Np} = 2x_5(b+1) + \sqrt{x_5}(b.Kd + Ka) \quad (16)$$

llamando  $Z_5 = \sqrt{x_5}$  luego (16) se resuelve como,

$$Z_5 = \frac{-(b.Kd + Ka) + \sqrt{(b.Kd + Ka)^2 + 8(b+1) * H / Np}}{4(b+1)} \quad (17)$$

$x_2, x_5, x_7$  y  $x_{10}$  surgen de  $Z_5$ ,

$$\begin{aligned} x_5 &= Z_5^2 & x_7 &= bKd\sqrt{x_5} = b.Kd.Z_5 \\ x_2 &= bx_5 = bZ_5^2 & x_{10} &= Ka\sqrt{x_5} = KaZ_5 \end{aligned} \quad (18)$$

Repitiendo el procedimiento para el balance de nitrógeno

$$\frac{N}{Np} = 2x_6 + b.Kf\sqrt{x_6} + Kg\sqrt{x_6} \quad (19)$$

llamando  $Z_6 = \sqrt{x_6}$  luego (19) se resuelve como,

$$Z_6 = \frac{-(b.Kf + Kg) + \sqrt{(b.Kf + Kg)^2 + 8N / Np}}{4} \quad (20)$$

$x_6, x_8, x_9, x_{11}$  y  $x_1$  son luego,

$$\begin{aligned} x_6 &= Z_6^2 & x_8 &= bKf\sqrt{x_6} = b.Kf.Z_6 & x_9 &= Kb\sqrt{x_1} \\ x_{11} &= Kg\sqrt{x_6} = KgZ_6 & x_1 &= b^2 Kc \end{aligned} \quad (21)$$

Tomando la (14.4) y reemplazándola en la ecuación para el balance de Carbono (11.1)

$$C = Np(x_3 + x_4) = Np\left(\frac{x_4 b}{Ke} + x_4\right) \longrightarrow x_4 = \frac{C}{Np} \frac{Ke}{(b + Ke)} \quad x_3 = \frac{x_4 b}{Ke} \quad (22)$$

De este modo las 11 fracciones molares para los productos  $x_{pj}$  quedan determinadas.

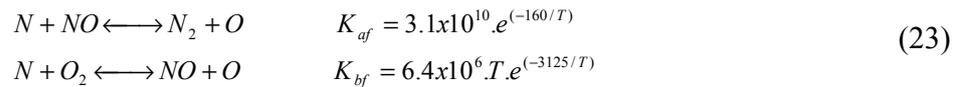
## 4.2 Cinética del NO

La formación de óxido nítrico es un proceso complejo que involucra varios mecanismos. Los modelos de mayor relevancia a la hora de predecir la formación de  $NO$  en un motor son:

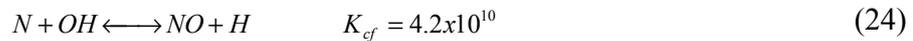
- térmico  $\rightarrow$  Formación de  $NO$  en la zona quemada
- prompt  $\rightarrow$  Formación de  $NO$  en el frente de llama

- Combustible → Formación de NO por la presencia de nitrógeno en el combustible

De los tres modelos sólo el térmico es aplicado en este trabajo. Este mecanismo es la fuente predominante de formación de NO a temperaturas por encima de 1800 K. El NO es formado a partir de la combinación de radicales libres de O y N, los cuales se encuentran en abundancia a alta temperatura<sup>4</sup>. Un modelo de reacción en dos pasos, conocido como mecanismo de Zeldovich resulta dominante en el proceso,



Una ecuación adicional resulta importante para relaciones de equivalencia ( $\varphi$ ) cercanas o por debajo de la estequiométrica.



donde  $K_f$  son las velocidades de reacción hacia delante y están dadas en  $Kmol / m^3s$ .

Las ecuaciones (23) y (24) son conocidas como mecanismo de Zeldovich extendido. Desde un análisis de las constantes de velocidad de reacción puede decirse que la reacción (23.1) será limitante en el mecanismo de Zeldovich por ser la más lenta. Dado que para este trabajo las concentraciones de las restantes especies son consideradas en equilibrio, una expresión para la velocidad de formación de NO dada por Benson y colaboradores<sup>6</sup> fue usada

$$[\dot{NO}] = 2(1 - \alpha^2) \left[ \frac{R_1}{1 + \alpha R_1 / (R_2 + R_3)} \right] - [NO] \frac{\dot{V}_b}{V_b} \quad \alpha = \frac{[NO]}{[NO]_e} \quad (25)$$

donde  $[NO]_e$  es la concentración molar del NO en equilibrio y tiene unidades de  $kmol / m^3$  y  $R_i$  ( $i = 1, 2$  y  $3$ ) es la velocidad de reacción en una dirección para una reacción genérica con reactantes  $a$  y  $b$  y productos  $c$  y  $d$

$$R_i = K_{if} [a][b] = K_{ib} [c][d] \quad (26)$$

## 5 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Los resultados experimentales utilizados para contrastar las simulaciones así como los datos constructivos y operativos fueron inferidos a partir del trabajo de Caton<sup>1</sup>.

La simulación consistió en ensayar el cilindro de un motor de 8 cilindros en V, alimentado con iso-octano y con las características descritas en la tabla 2. Se trabajó con carga parcial en el cilindro con una presión en la admisión de 52 a 58 Kpa y una presión en el escape de 1050 Kpa de modo de obtener una cantidad de masa durante la combustión cercana a  $3.9 \times 10^{-4}$  Kg para todos los casos analizados.

Constructivos		Funcionamiento	
Diámetro del cilindro (mm)	101,6	Combustible	Iso-octano
Carrera (mm)	88,4	Relación A/F	15,13
Volumen desplazado (dm <sup>3</sup> )	5,733	Angulo de ignición $\theta_{ig}$	-22° y -26,5°
Radio cigüeñal / longitud biela	0,305	Presión en ducto de entrada (Kpa)	52 - 58
Relación de compresión	8,1:1	Presión en ducto de escape (Kpa)	105
<b>Válvula admisión</b>		Velocidad del motor (rpm)	1400
Diámetro (mm)	50,8	Temp. gases de entrada (K)	319
Alzada máxima (mm)	9,75	Temp. pared del cilindro (K)	450
AAA	14°	Duración de la combustión $\theta_b$	60°, 80° y 100°
RCA	64°	Coefficiente $m$ (función de Wiebe)	2,2
<b>Válvula de escape</b>		Coefficiente $a$ (función de Wiebe)	5
Diámetro (mm)	39,6	Masa de mezcla en el cilindro (Kg)	$3.8e^{-4}$ a $4e^{-4}$
Alzada máxima (mm)	10,3	Angulo de retraso de la ignición $\theta_d$	12,5°
AAE	64°		
RCE	26		

Tabla 2. Aspectos constructivos y de funcionamiento del modelo.

Se analizaron las curvas de temperatura y presión para  $\varphi=1$  y una duración de la combustión de 60°, 80° y 100°. Los resultados para 60° son mostrados en la figura 1. Los puntos corresponden a los resultados experimentales hallados por Heywood<sup>7</sup>.

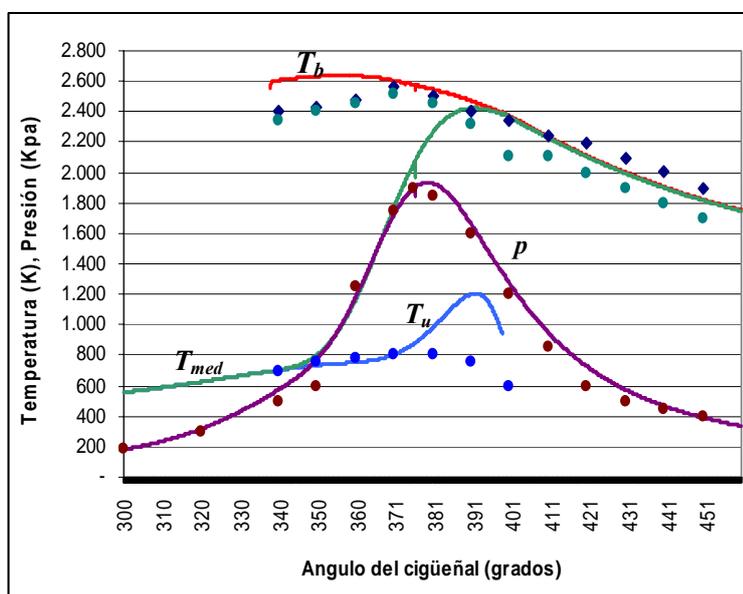


Figura 1. Presión en el cilindro y Temperaturas de la zona quemada, no quemada y promedio en función del ángulo del cigüeñal para  $\theta_b = 60^\circ$  y una relación de compresión de 8,1.

La temperatura promedio de los gases de escape en función de la relación de compresión

fue simulada para los tres periodos de combustión. Los resultados numéricos hallados tanto por Heywood<sup>7</sup> (puntos) como mediante nuestro simulador (lineas) son mostrados en la figura 2.

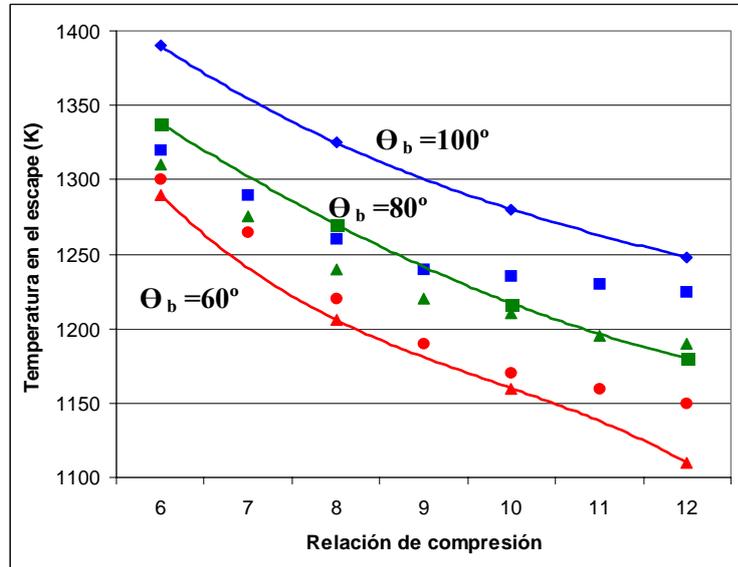


Figura 2. Temperatura de los gases de escape en función de la duración de la combustión y de la relación de compresión.

Los niveles de emisiones de  $NO$  obtenidos con el simulador fueron contrastados con simulaciones similares presentadas por Caton<sup>2</sup> con los datos del motor anterior pero variando el ángulo de ignición  $\theta_{ig}$  a  $-26,5^\circ$  y el parámetro  $m$  de la función de Wiebe de 2,2 a 2.

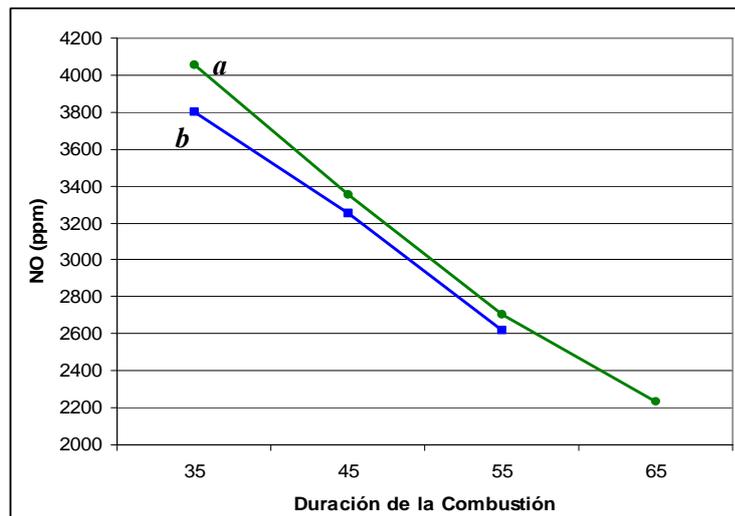


Figura 3. Emisión de  $NO$  en ppm en función de la duración de la combustión ( $\theta_{ig} = 26.6^\circ$ ). a) Resultados obtenidos b) Resultados presentados por Caton<sup>2</sup>.

De este modo se obtuvieron las concentraciones de *NO* en función de la duración de la combustión para un ángulo de ignición fijo y en función del ángulo de ignición para una duración de la combustión fija (ver figura 3).

El nivel de emisiones arrojado por este trabajo resultó superior al reflejado por la simulación de Caton<sup>2</sup>. Sin embargo esto era esperable dado que las temperaturas estimadas en nuestro trabajo resultaron superiores durante los primeros 20° de la etapa de combustión.

## 6 CONCLUSIONES Y TAREAS A FUTURO

La simulación de un motor de ignición por chispa de cuatro tiempos incluyendo un tratamiento en dos zonas de la etapa de combustión fue desarrollada. El estudio de las concentraciones de productos fue abordado y las emisiones de *NO* estimadas fueron contrastadas con un estudio similar. La presión en el ducto de entrada fue ajustada a fin de obtener estados de carga similares al variar otros parámetros a fin de comparar mejor los resultados. Las conclusiones de este trabajo son:

- Los resultados de la simulación son consistentes con otros hallados tanto por Heywood<sup>7</sup> como por Caton<sup>1</sup> en simuladores similares, ambos descritos en la bibliografía.
- El uso de modelos contemplando sólo dos zonas, una quemada y una no quemada, no resultó suficiente para estimar con precisión la temperatura en la zona quemada, particularmente cuando se intenta abordar un estudio de emisiones de *NO* para las cuales diferencias de temperatura de solo 50° en la zona de combustión resultan en cambios considerables en las emisiones estimadas respecto de las reales<sup>2</sup>.
- Las diferencias entre la simulación y los valores de temperatura reportados experimentalmente implican la necesidad de mejorar los modelos de transferencia de calor.

Las tareas previstas a fin de mejorar este simulador son principalmente:

- Aplicar el concepto de zona adiabática y zona de capa límite dentro de la zona quemada.
- Agregar modelos 1-D para el cálculo del flujo en ductos de admisión y escape.
- Adoptar un modelo de velocidad de propagación del frente de llama que tenga en cuenta la turbulencia de la mezcla.
- Adoptar un modelo de retraso a la ignición.
- Adoptar modelos de transferencia de calor más realistas.
- Extender la experiencia hecha con modelos de combustión 0D/1D al caso con geometría 3-D.

## 7 REFERENCIAS

- [1] J. A. Caton, *A Multiple-Zone Cycle Simulation for Spark-Ignition Engines: Thermodynamic Details*, 2001 Fall Technical Conference of the ASME-ICED, (2001).
- [2] J. A. Caton, *The Effects of Cycle-to-Cycle Variations on Nitric Oxide (NO) Emissions for a Spark-Ignition Engine: Numerical Results*, 2004 Technical Meeting of the Central States Section of the Combustion Institute, (2004).
- [3] JANNAF Thermochemical Tables, 1971 2d ed., NSRDS-NB537, U.S. National Bureau of Standards, (1971).
- [4] J. I. Ramos, *Internal Combustion Engine Modeling*, Hemisphere Publishing Corporation, (1989).
- [5] J. B. Heywood, *Internal Combustion Engine Fundamentals*, Mc Graw-Hill Inc, (1988).
- [6] R. S. Benson, W.J.D. Annand, P.C. Baruah, *A simulation Model Including Intake and Exhaust Systems for a Single Cylinder Four-Stroke Cycle Spark Ignition Engine*, Int. J. Mech. Sci., vol. 17, pp. 97-124, (1975).
- [7] J. B. Heywood, J. M. Higgins, P. A. Watts y R. J. Tabaczynski, *Development and Use of a Cycle Simulation to Predict SI Engine Efficiency and NO<sub>x</sub> Emissions*, Society of Automotive Engineers, SAE paper no. 981424, (1979).
- [8] N. Nigro, M. Storti y L. Ambroggi, *Modelización Numérica de un Motor de Combustión Interna Monocilíndrico*, Revista Internacional de Métodos Numéricos para cálculo y diseño en Ingeniería, 15,1, pp. 21-54 (1999).
- [9] J. Alianak and N. Nigro, *Intake and exhaust system optimization of internal combustion engines*, Report Técnico RT-ID-012/2003, Universidad Nacional de Rosario. Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, (2003).
- [10] R. Tabaczynski, C. Ferguson, K. Radhakrishnan, *A turbulent entrainment model for spark ignition engine combustion*, SAE paper 770647 (1978).

## 8 APÉNDICE

### 8.1 Metodología para la solución del sistema de ecuaciones simplificado

El sistema puede ser resuelto mediante un método indirecto iterando un algoritmo de Newton. Para comenzar a iterar, valores para  $b$  pueden aproximarse según

$$\begin{aligned} \text{para } T > 3000 \text{ K} & \quad b = \exp(10.3 - (3.1 - 0.17 * \log P) \frac{T}{1000}) & (27) \\ \text{para } T < 3000 \text{ K} & \quad b = \exp(-9.0 + \frac{1}{2} \log P + \frac{30000}{T}) \end{aligned}$$

ajustando  $b$  según los siguientes casos

$$\begin{aligned} BX &= 2 - 9 \log \phi \\ \text{si } \rightarrow BX > 3.5 & \longrightarrow B = \exp(\exp(3.5) + 0.25 \log P) \\ \text{si } \rightarrow BX \leq 3.5 & \longrightarrow B = \exp(\exp(2 - 9 \log \phi) + 0.25 \log P) \end{aligned} \quad (28)$$

luego si  $b > B$  entonces  $b = B$ . En tanto que para aproximar  $Np$  puede tomarse como valor inicial el número de moles reactantes.

A partir de los valores de  $Np$  y  $b$  tomados se calculan las 11 fracciones molares las cuales deben verificar luego tanto la ecuación (13) como la (14.3),

$$e_s = \sum_{i=1}^N x_i - 1 = 0, \quad e_r = Np(2x_1 + x_2 + 2x_3 + x_4 + x_7 + x_8 + x_9) - O = 0 \quad (29)$$

donde  $e_s$  y  $e_r$  es el error para cada una de las dos ecuaciones a verificar. El sistema queda resuelto cuando al cabo de  $n$  iteraciones la norma del error resulta menor al valor de tolerancia especificado. Tanto  $e_s^n$  como  $e_r^n$  son función de  $b^{n-1}$  y  $Np^{n-1}$ .

Los valores de  $b^n$  y  $Np^n$  son hallados mediante el método de Newton con incrementos dados por

$$b^n = b^{n-1} + \Delta b \quad Np^n = Np^{n-1} + \Delta Np \quad (30)$$

donde

$$\Delta Np = \frac{-e_r \frac{\partial e_s}{\partial b} + e_s \frac{\partial e_r}{\partial Np}}{\det[J(b^{n-1}, Np^{n-1})]} = \frac{-e_r J(2,2) + e_s J(1,2)}{\det[J(b^{n-1}, Np^{n-1})]} \quad \Delta b = \frac{e_r \frac{\partial e_s}{\partial Np} - e_s \frac{\partial e_r}{\partial b}}{\det[J(b^{n-1}, Np^{n-1})]} = \frac{e_r J(2,1) - e_s J(1,1)}{\det[J(b^{n-1}, Np^{n-1})]} \quad (31)$$

siendo  $J$  el jacobiano dado por

$$J(b^{n-1}, Np^{n-1}) = \begin{vmatrix} \frac{\partial e_r}{\partial Np} & \frac{\partial e_r}{\partial b} \\ \frac{\partial e_s}{\partial Np} & \frac{\partial e_s}{\partial b} \end{vmatrix} = \frac{\partial e_r}{\partial Np} \frac{\partial e_s}{\partial b} - \frac{\partial e_r}{\partial b} \frac{\partial e_s}{\partial Np} \quad (32)$$

## 8.2 Modelo para el desplazamiento del pistón

La posición  $s$  del pistón al tiempo  $t$  puede hallarse mediante el conocido modelo biela manivela. Luego  $V_{tot}$ ,  $\partial s/\partial t$ ,  $\partial V_{tot}/\partial t$  son fácilmente calculadas,

$$s(t) = r_a \cos(\omega t) + \sqrt{l^2 - r_a^2 \sin^2(\omega t)} \quad \dot{s} = \frac{ds}{dt} = -r_a \omega \sin(\omega t) - \frac{w r_a^2 \sin(\omega t) \cos(\omega t)}{\sqrt{l^2 - r_a^2 \sin^2(\omega t)}} \quad (33)$$

$$V(t) = V_c + \frac{\pi B^2}{4} (l + r_a + s(t)) \quad \dot{V} = \frac{dV}{dt} = \frac{\pi B^2}{4} \left[ -r_a \omega \sin(\omega t) - \frac{w r_a^2 \sin(\omega t) \cos(\omega t)}{\sqrt{l^2 - r_a^2 \sin^2(\omega t)}} \right]$$

## 8.3 Transferencia de calor

Conocido el volumen de la zona quemada y considerando un avance esférico de la combustión, la posición del frente de llama y las áreas de transferencia de calor para cada zona pueden ser relacionadas a  $V_b$  según

$$r < Bo \rightarrow r = \sqrt[3]{\frac{3V_b}{2\pi}} \quad A_b = \pi r^2 \quad A_u = A_p + \pi Bo(l + r_a - s) \quad (34)$$

para  $(l+a-s) > r_b > Bo$  la posición del frente es hallada al resolver la ecuación

$$r > Bo \rightarrow V_b = \frac{\pi Bo^2 (r_b^2 - Bo^2)}{4} + \left[ \pi \frac{(r_b^2 - Bo^2)}{3} (2r_b + \sqrt{r_b^2 - Bo^2}) \right] \quad (35)$$

$$A_b = A_{ch} + \pi Bo \sqrt{r_b^2 - Bo^2} \quad A_u = A_p + \pi Bo(l + r_a - s - \sqrt{r_b^2 - Bo^2}) \quad (36)$$

y al finalizar la combustión ( $V_u = 0$ )

$$r_b = l + r_a - s \quad A_b = A_{ch} + A_p + \pi Bo(l + r_a - s) \quad A_u = 0 \quad (37)$$

El coeficiente pelicular puede calcularse mediante una expresión del tipo

$$h_{ic} = \frac{Nu k_i}{Bo} \quad (38)$$

donde  $Nu$  es el número de Nusselt,  $k$  es la conductividad térmica del fluido.

$$Nu = a Re^b Pr^c \quad k_i = \frac{\mu_i Cp_i}{Pr} \quad \mu_i = 1,457 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{T_i^3}}{110 + T_i} \quad Re = \frac{\rho |Sp| Bo}{\mu} \quad (39)$$

El número de Prandtl fue tomado igual a 0.72. Los coeficientes  $a$ ,  $b$  y  $c$  usados en la correlación para el número de  $Nu$  fueron 0.7, 0.8 y 0.33 respectivamente.

## 9 NOMENCLATURA

El sub-índice  $u$  indica zona no quemada.

El sub-índice  $b$  indica zona quemada.

El sub-índice  $in$  indica válvula de admisión.

El sub-índice  $ex$  indica válvula de escape.

El sub-índice  $f$  indica frente de llama.

El punto  $\dot{\phantom{x}}$  sobre la variable indica derivada de esa variable con respecto al tiempo.

$r_a$	Radio del cigüeñal	$Sp$	Velocidad promedio del pistón
$r_b$	Radio del frente de llama	$y_b$	Tasa de quemado volumétrica
$A$	Área de transferencia de calor	$V$	Volumen instantáneo en el cilindro
$A_{ch}$	Área de la tapa de cilindro	$\omega$	Velocidad angular del cigüeñal
$A_p$	Área de la cabeza del pistón	$\delta$	Densidad de la mezcla
$CA$	Angulo de giro del cigüeñal	$\mu$	Viscosidad cinemática de la mezcla
$Cp$	Calor específico a presión constante	$\gamma$	Relación de calores específicos $Cp / Cv$
$Cv$	Calor específico a volumen constante	$Q_{ht}$	Calor transferido
$h$	Entalpía específica	$P$	Presión instantánea en el cilindro

$h_c$	Coeficiente pelicular	$T$	Temp. instantánea en el cilindro
AAA	Apertura válvula de admisión	$T_{wall}$	Temp. de las paredes del cilindro
RCA	Cierre válvula de admisión	$T_{fr}$	Temp. de congelamiento reacciones químicas
AAE	Apertura válvula de escape	$L_v$	Alzada de la válvula
RCE	Cierre válvula de escape	sfc	Consumo específico de combustible
$m$	Masa total de fluido	$t$	Tiempo
$C_Q$	Coeficiente. térmico adoptado igual a 0.8	$\phi$	Relación másica combustible / aire
$l$	Longitud. de la biela	$\theta_b$	Duración de la combustión
$s$	Longitud. de cigüeñal a cabeza del pistón	$\theta_{ig}$	Angulo de inicio de la combustión
$x_b$	Tasa de quemado másica	$n_{ig}$	Moles de mezcla fresca al inicio de la ignición